

Apêndice B

Modelagem Simplificada do Método de Elementos Distintos para Sistemas Sólido-Fluido

B.1 – Introdução

Neste apêndice, discute-se um modo de tornar o Método de Elementos Distintos apto à simulação de alguns sistemas sólido-fluido nos quais os movimentos das duas fases são mutuamente dependentes. Para isto, consideram-se como forças de campo aquelas exercidas sobre as partículas pelo movimento de um fluido no seu entorno. Desta forma, a Equação (5.4.4) deve ser substituída por

$$\mathbf{F}_i^{\{c\}} = m_i^* \mathbf{g} + \mathbf{F}_i^{\{a\}}, \quad (\text{B.1})$$

onde $\mathbf{F}_i^{\{a\}}$ é a força de arrasto provocada pelo fluido sobre uma partícula “i”.

A solução mais direta seria a modelagem do fluido como um *continuum* que escoaria através dos interstícios, considerando-se como contornos as superfícies das partículas. Assim, obter-se-iam os campos de tensões do fluido por meio da Equação de Navier-Stokes, utilizando-se técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD). Em sequência, calcular-se-iam as forças de arrasto através de integrações destas tensões ao longo da área superficial de cada partícula. Porém, como se discutiu no Capítulo 2, esta abordagem pode se tornar demasiadamente complicada para sistemas com muitas partículas. O principal motivo é a complexa geometria do espaço intersticial, agravado pelo fato de que as partículas podem estar em ininterrupto movimento. Isto exigiria a sucessiva construção de malhas intrincadas para a discretização das equações de balanço, o que, por si, já seria um problema de difícil tratamento. Além disto, o número de equações algébricas a serem resolvidas em cada instante poderia demandar um esforço computacional excessivo. Uma alternativa a esta abordagem seria o uso de correlações empíricas para cálculo direto do arrasto a partir de descrições simplificadas do escoamento do fluido ao redor da partícula. Imagine-se, por exemplo, que seja possível

identificar um valor representativo da velocidade do fluido em torno de uma partícula “i” [$\mathbf{v}_f(\mathbf{r}_i, t)$], em qualquer instante. Assim, poder-se-ia calcular uma velocidade relativa entre fluido e partícula ($\mathbf{v}_i^{\{f\}}$) como

$$\mathbf{v}_i^{\{f\}}(t) = \mathbf{v}_f(\mathbf{r}_i, t) - \mathbf{v}_i(t), \quad (\text{B.2})$$

onde as velocidades do fluido e da partícula são relativas ao mesmo referencial.

Da velocidade relativa $\mathbf{v}_i^{\{f\}}(t)$ e, portanto, do perfil instantâneo de velocidades do fluido, dependeria a força de arrasto sobre a partícula “i” no instante t. Conforme se apresentou no Capítulo 2, a forma mais comumente utilizada para se obter o referido perfil é aquela baseada na proposta de Tsuji *et al.* (1993), que consiste em definir, para a discretização das equações de balanço através do Método dos Volumes Finitos (Maliska, 1995), células com volumes muito superiores aos das partículas, e se considerar a fração volumétrica e a velocidade do fluido constantes em cada célula. Assim, os valores de tais variáveis em uma determinada célula podem ser usados no cálculo do arrasto sobre todas as partículas nela inseridas, o que é feito, geralmente, por meio de correlações empíricas. Neste trabalho, propõe-se uma alternativa ainda mais reducionista, aplicável somente em alguns casos, que consiste na integração das propriedades do fluido em uma ou mais dimensões do sistema. Por exemplo, considerando-se um sistema tridimensional, modela-se o fluido de forma uni ou bidimensional e, então, calculam-se as variáveis de interesse integradas nas dimensões (ou na dimensão) não abordadas no equacionamento. Como exemplo, considere-se o escoamento do fluido como unidimensional na direção z do sistema de coordenadas. Neste caso, necessita-se de uma modelagem que forneça um campo escalar de velocidades do fluido, $v_f(z, t)$, que se relaciona ao campo vetorial presente na Equação (B.2) através de

$$\mathbf{v}_f(\mathbf{r}, t) = v_f(z, t) \hat{\mathbf{k}}, \quad (\text{B.3})$$

onde $\mathbf{r} = (x, y, z)$ e $\hat{\mathbf{k}}$ é o vetor unitário na direção e no sentido do eixo z.

O acoplamento entre os movimentos do fluido e das partículas é feito da seguinte maneira. Primeiramente, em determinado instante t , dadas as posições e velocidades das partículas (oriundas da integração das suas equações do movimento), calcula-se o campo instantâneo de velocidades do fluido, $v_f(z, t)$. Então, a partir de tal campo, computa-se a força de arrasto imposta a cada partícula, somando-a às demais forças de campo [Equação (B.1)]. Em seguida, calculam-se as forças de interação e a resultante sobre cada partícula, conforme a formulação do Capítulo 5. Finalmente, realiza-se um novo passo de integração, obtendo-se as novas posições e velocidades das partículas no instante $t + \Delta t$, de modo que se possa recommençar todo o procedimento.

A Seção B.2 é dedicada a um equacionamento para cálculo do campo $v_f(z, t)$, na presença de um conjunto de partículas com posições e velocidades conhecidas. Na Seção B.2, mostra-se como computar a força de arrasto sobre cada uma delas a partir do campo de velocidades obtido.

B.2 – Determinação do Perfil de Velocidades do Fluido

O campo $v_f(z, t)$ pode ser obtido através da Teoria do *Continuum*. Assim sendo, aplica-se a Lei de Conservação de Massa às fases fluida e sólida para se obter, respectivamente,

$$\frac{\partial(\epsilon_f \rho_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\epsilon_f \rho_f v_f)}{\partial z} = 0 \text{ e} \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{\partial(\epsilon_s \rho_s)}{\partial t} + \frac{\partial(\epsilon_s \rho_s v_s)}{\partial z} = 0, \quad (\text{B.5})$$

onde ϵ_f , ϵ_s , ρ_f , ρ_s e v_s são, assim como v_f , funções de z e t . Entre as novas grandezas, ϵ_s , ρ_s e v_s são, respectivamente, a fração volumétrica, a densidade média e a velocidade transversal da fase sólida em cada coordenada z e tempo t . Estas variáveis que, juntamente com v_f , determinam o acoplamento entre os movimentos do fluido e das partículas, serão caracterizadas a seguir.

O campo de frações volumétricas de sólido, $\varepsilon_s(z, t)$, depende das posições das partículas em cada instante. Como a modelagem é unidimensional na direção z , aproxima-se ε_s pela fração superficial de sólidos na altura z , definida como

$$\varepsilon_s(z, t) = \frac{A_s(z, t)}{A} = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} A_i(z, t)}{A}, \quad (\text{B.6})$$

onde A é a área da seção reta do recipiente que contém as partículas e A_i é a área da seção reta de uma dada partícula “i”, calculada em z e t . Por simplicidade, consideram-se apenas recipientes cujas seções retas tenham áreas independentes da altura e do tempo. Se, por exemplo, o recipiente for um cilindro de diâmetro D e com eixo central alinhado ao eixo z , tem-se uma área seccional constante dada por

$$A = \frac{\pi D^2}{4}. \quad (\text{B.7})$$

Para o cálculo de A_i , considere-se a Figura B.1. Sabendo-se que a partícula “i” pode ser obtida a partir de uma revolução do círculo mostrado em torno do eixo vertical que passa pelo seu centro, conclui-se que A_i , sendo calculada na altura z , é igual à área de um círculo de raio δ , ou seja, igual a $\pi\delta^2$. Porém, A_i será nula quando a distância $|z - r_{iz}|$ for maior ou igual ao raio da partícula, onde r_{iz} é a componente z do ponto central na partícula “i” no instante t . Através do Teorema de Pitágoras, tem-se que $\delta^2 + (z - r_{iz})^2 = R_i^2$. Logo, pode-se calcular a área A_i por

$$A_i(z, t) = \begin{cases} \pi\{R_i^2 - [z - r_{iz}(t)]^2\} & \text{se } |z - r_{iz}(t)| < R_i \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}. \quad (\text{B.8})$$

Como se considera um sistema formado por apenas duas fases, a soma das frações de sólido e fluido deve ser igual à unidade, o que leva ao seguinte resultado:

$$\varepsilon_f(z, t) = 1 - \varepsilon_s = 1 - \frac{\sum_{j=1}^{N_p} A_j(z, t)}{A}. \quad (\text{B.9})$$

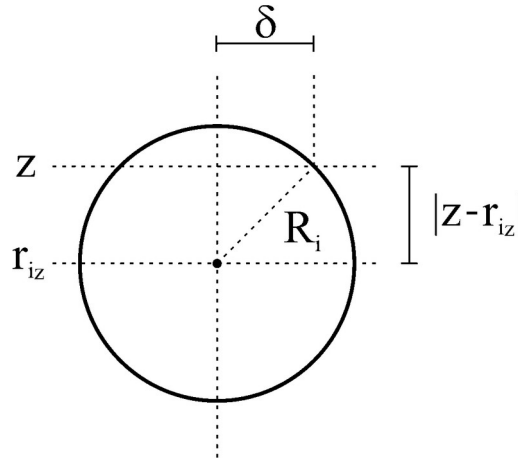


Figura B.1 – Esquema para cálculo da área da seção reta de uma partícula em uma coordenada z .

Admitindo-se que a densidade do fluido é constante (fluido incompressível), a Equação (B.4) pode ser rescrita como

$$\frac{\partial \varepsilon_f}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon_f v_f)}{\partial z} = 0. \quad (\text{B.10})$$

A princípio, poder-se-ia repetir o procedimento para a fase sólida, mas esta atitude precisa ser ponderada. A densidade ρ_s , presente na equação de balanço, não é a densidade individual de uma partícula, mas a densidade média das seções das partículas que se encontram, em um dado instante t , na altura z . Considerando-se uma camada delgada de altura constante Δz em torno da coordenada z , a massa total de sólido que se encontra em seu interior (m_s) é dada por

$$m_s = \rho_s A_s \Delta z = \sum_{i=1}^{N_p} \rho_i A_i \Delta z, \quad (\text{B.11})$$

onde A_s é a área total ocupada por partículas sólidas, idêntica à que consta na Equação (B.6). Assim sendo, o campo de densidade de sólido é obtido através de

$$\rho_s(z, t) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \rho_i A_i(z, t)}{\sum_{i=1}^{N_p} A_i(z, t)}. \quad (\text{B.12})$$

Portanto, ρ_s será indubitavelmente constante apenas quanto todas as partículas do sistema tiverem a mesma densidade. No entanto, por questão de simplicidade, a hipótese da invariabilidade de ρ_s será adotada neste trabalho. Desta forma, a Equação de Balanço (B.5) se torna

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} + \frac{\partial (\varepsilon_s v_s)}{\partial z} = 0. \quad (\text{B.13})$$

Resta, agora, definir o que é a velocidade transversal de sólidos em uma dada altura z e tempo t (v_s). Afirma-se que esta velocidade está diretamente relacionada à vazão mássica de sólidos (\dot{m}_s) que atravessa, no instante t , o plano correspondente à coordenada z em questão. Tal vazão mássica é dada por

$$\dot{m}_s = \rho_s A_s v_s = \sum_{i=1}^{N_p} \rho_i A_i v_{iz}, \quad (\text{B.14})$$

onde v_{iz} é a componente z da velocidade de translação de uma determinada partícula “ i ”. Substituindo-se os resultados, já conhecidos, de ρ_s e A_s , chega-se a

$$v_s(z, t) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \rho_i A_i(z, t) v_{iz}(t)}{\sum_{i=1}^{N_p} \rho_i A_i(z, t)}. \quad (\text{B.15})$$

Para se determinar a consistência das definições apresentadas para ε_s , ρ_s e v_s , basta demonstrar que elas satisfazem o balanço de massa da fase sólida, dado pela Equação (B.5). A partir das Equações (B.6) e (B.12), tem-se que

$$\varepsilon_s \rho_s = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \rho_i A_i(z, t)}{A} e \quad (B.16)$$

$$\varepsilon_s \rho_s v_s = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \rho_i A_i(z, t) v_{iz}(t)}{A}. \quad (B.17)$$

Substituindo-se os resultados acima na Equação (B.5), chega-se a

$$\frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{i=1}^{N_p} \rho_i A_i(z, t) \right] + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial z} \left[\sum_{i=1}^{N_p} \rho_i A_i(z, t) v_{iz}(t) \right] = 0. \quad (B.18)$$

Visto que a derivada da soma de funções contínuas é igual à soma das derivadas, reescreve-se a equação acima da seguinte maneira:

$$\sum_{i=1}^{N_p} \rho_i \left[\frac{\partial A_i}{\partial t} + v_{iz}(t) \frac{\partial A_i}{\partial z} \right] = 0. \quad (B.19)$$

Os termos para os quais $A_i = 0$ não contribuem para o somatório acima. Para os demais termos, a partir de Equação (B.8), tem-se que

$$\frac{\partial A_i}{\partial t} = -2\pi[z - r_{iz}(t)] \frac{\partial r_{iz}}{\partial t} = -2\pi[z - r_{iz}(t)] v_{iz}(t) e \quad (B.20)$$

$$\frac{\partial A_i}{\partial z} = 2\pi[z - r_{iz}(t)]. \quad (B.21)$$

Assim, nota-se que os termos para os quais $A_i \neq 0$ também não contribuem para o referido somatório, pois

$$\frac{\partial A_i}{\partial t} + v_{iz}(t) \frac{\partial A_i}{\partial z} = -2\pi[z - r_{iz}(t)] v_{iz}(t) + v_{iz}(t) 2\pi[z - r_{iz}(t)] = 0. \quad (B.22)$$

Em outras palavras, a equação de balanço de massa de sólidos é identicamente satisfeita com as definições apresentadas para o caso em questão, o que demonstra a sua

consistência. Ressalta-se que esta análise foi feita considerando-se constante a área da seção reta do recipiente.

Parte-se, então, para a solução da equação de balanço de massa de fluido. Somando-se as Equações (B.10) e (B.13), obtém-se

$$\frac{\partial(\varepsilon_f + \varepsilon_s)}{\partial t} + \frac{\partial[\varepsilon_f v_f + \varepsilon_s v_s]}{\partial z} = 0. \quad (\text{B.23})$$

Como a soma das frações de fluido e sólido é sempre igual a um, a equação acima leva à conclusão de que o termo entre colchetes não é função da coordenada z , sendo, então, função exclusiva de t , ou seja,

$$\varepsilon_f v_f + (1 - \varepsilon_f) v_s = f(t). \quad (\text{B.24})$$

Para se determinar a função $f(t)$, imagina-se que o fluido seja injetado no sistema a uma velocidade $v_f = v_f^0(t)$ e em uma posição onde haja total ausência de sólidos. Em tal posição, como $A_i = 0$ para todo “ i ”, a velocidade v_s é indefinida [Cf. Equação (B.15)]. No entanto, isto é irrelevante, pois $\varepsilon_f = 1$ nesta mesma altura, de modo que o segundo termo do lado esquerdo da equação acima se anula. Então, tem-se que

$$f(t) = v_f^0(t). \quad (\text{B.25})$$

Portanto, a partir da Equação (B.24), a velocidade do fluido pode ser obtida por

$$v_f(z, t) = \frac{v_f^0(t)}{\varepsilon_f(z, t)} - \frac{1 - \varepsilon_f(z, t)}{\varepsilon_f(z, t)} v_s(z, t). \quad (\text{B.26})$$

A equação acima decorre de uma interferência recíproca entre os movimentos das fases fluida e granular, visto que as forças de arrasto sobre as partículas, em cada instante, dependem do perfil de velocidades do fluido (v_f), e este, por sua vez, dos

perfis de frações de fluido (ε_f) e de velocidades do sólido (v_s), ambos advindos das posições e velocidades instantâneas das partículas. Além disto, observa-se que, mesmo não havendo injeção de fluido no sistema [$v_f^0(t) = 0$], a sua velocidade não será nula onde houver movimento resultante de partículas da direção z . Por exemplo, durante a sedimentação de partículas em um líquido macroscopicamente estático, haverá deslocamentos ascendentes do fluido em torno delas, que tenderá a ocupar os lugares por elas abandonados.

Os perfis de pressões das fases líquida e granular poderiam ser calculados através de equações de balanço de momento. O fato de tais equações não terem sido necessárias para a obtenção do perfil de velocidades do fluido se deve à condição de contorno utilizada, que corresponde a uma injeção de fluido com velocidade predefinida. Elas seriam necessárias se, diversamente, fosse predefinida a pressão de injeção.

B.3 – Cálculo da Força de Arrasto

Em geral, define-se a força de arrasto sobre uma partícula isolada como o produto entre a sua área (transversal ao movimento do fluido), a energia cinética do fluido por unidade de volume (relativa ao movimento da partícula) e um parâmetro adimensional, dependente do número de Reynolds da partícula, chamado de **coeficiente de arrasto** (Bird *et al.*, 1960, p. 182). Se uma partícula esférica “i” estiver isolada, a força de arrasto sobre ela ($\mathbf{F}_i^{\{a,isol\}}$) terá direção e sentido iguais aos da velocidade relativa $\mathbf{v}_i^{\{f\}}$, dada pela Equação (B.2). Então, segundo a definição acima, tem-se que

$$\mathbf{F}_i^{\{a,isol\}} = C_i^{\{a\}} \pi R_i^2 \frac{\rho_f \|\mathbf{v}_i^{\{f\}}\|}{2} \mathbf{v}_i^{\{f\}}, \quad (\text{B.27})$$

onde $C_i^{\{a\}}$ é o coeficiente de arrasto da partícula “i”, cujo valor depende do seu número Reynolds, Re_i , definido como

$$Re_i = \frac{2R_i \|\mathbf{v}_i^{\{f\}}\| \rho_f}{\mu_f}, \quad (\text{B.28})$$

onde μ_f é a viscosidade do fluido que, assim como a sua densidade, é considerada constante em todo o sistema.

Em geral, a função que relaciona o coeficiente de arrasto ao número de Reynolds é obtida empiricamente. Segundo Di Felice (1994), há uma correlação que promove representa adequadamente dados experimentais disponíveis em toda a faixa prática de números de Reynolds, a qual é expressa por

$$C_i^{\{a\}} = \left(0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re_i}} \right)^2. \quad (B.29)$$

As Equações (B.27) a (B.29) são válidas somente se a partícula “i” estiver isolada. A presença de outras partículas ao redor modifica o escoamento do fluido, provocando mudanças de direção, turbilhonamentos, etc. Assim, deve-se efetuar uma correção na força de arrasto calculada. Em estudos sobre fluidização ou sedimentação, é comum se utilizar um fator de correção para $\mathbf{F}_i^{\{a,isol\}}$ baseado no trabalho de Richardson e Zaki (*Apud* Di Felice, 1994), ou seja,

$$\mathbf{F}_i^{\{a\}} = \varepsilon_f^{-\beta} \mathbf{F}_i^{\{a,isol\}}, \quad (B.30)$$

onde β é um parâmetro que depende do regime de escoamento.

No entanto, deve-se atentar para um fato importante. Quando se aplica a correção acima em estudos sobre fluidização, diferentemente do que se deseja neste trabalho, a velocidade do fluido utilizada no cálculo de $\mathbf{F}_i^{\{a,isol\}}$ não é aquela calculada no entorno da partícula, chamada de “velocidade intersticial”, mas sim aquela com a qual o fluido é injetado no sistema, denominada de “velocidade superficial”. Assim, na correção realizada pelo termo $\varepsilon_f^{-\beta}$, levam-se em conta fatores diversos à presença de vizinhos, tais como o desconhecimento da velocidade intersticial e as interações com outras partículas. Além disto, o valor de ε_f empregado é a fração de fluido global do leito, e

não uma fração local, tal como se propõe aqui. Assim sendo, conclui-se que este tipo de correção não é apropriado ao presente trabalho. No momento, este aspecto da formulação encontra-se em aberto.

Por fim, considera-se válido um breve comentário. Quando se utiliza a Equação (B.30) para se calcular a força de arrasto sobre as partículas de um leito fluidizado, a velocidade relativa entre fluido e partícula, utilizada no cálculo de $\mathbf{F}_i^{\{a,isol\}}$, é igual à própria velocidade superficial do fluido (Di Felice, 1994; Di Felice, 1995). Isto é válido, já que a velocidade média das partículas é nula no regime permanente. Por outro lado, em estudos sobre a sedimentação de sólidos em suspensão, tal velocidade relativa é comumente tomada como sendo o recíproco da velocidade terminal com a qual as partículas sedimentam, o que equivale a considerar nula a velocidade do fluido. Isto pode ser uma boa aproximação para suspensões diluídas ($\varepsilon_f \approx 1$). Contudo, para altas concentrações, a Equação (B.26) mostra que há um escoamento ascendente do fluido. Portanto, parece haver uma incoerência conceitual na suposição de fluido imóvel para estes casos.